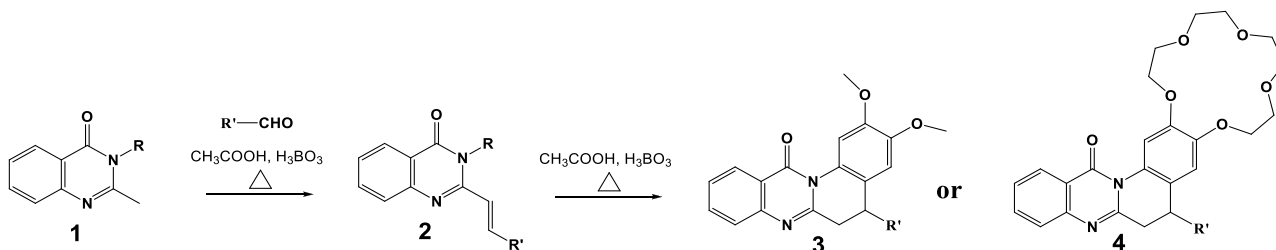


## ПЕРИЦИКЛИЧЕСКИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ В КАСКАДНОМ СИНТЕЗЕ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ 5-АРИЛ-5,6-ДИГИДРОХИНОЛИНО[2,1-*b*] ХИНАЗОЛИН-12-ОНОВ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИЙ\*

**Ключевые слова:** перициклические реакции, хинаязолиноны, квантово-химические расчёты.

Среди большого числа способов синтеза гетероатом-содержащих полициклических соединений одним из наиболее значимых и часто употребляемых является метод шестиэлектронной электроциклизации арильных полиенов с цис-1,3,5-триеновым фрагментом. Для многих ди(гет)арилэтиленов характерна фотохимическая конротаторная электроциклизация с последующими превращениями. Однако практически отсутствуют сведения о возможной термической электроциклизации у данных соединений.

Такой вид реакции был показан нами впервые для *E*-стирилхинаязолинонов с алкоксифенильным заместителем в 3-положении диазинонового цикла [1]. Установлено, что однореакторный синтез тетрациклических 5-арил-5,6-дигидрохинолино[2,1-*b*]хинаязолин-12-онов **3** и **4** можно осуществлять при взаимодействии соединения **1** с ароматическим альдегидом без выделения *E*-стирилхинаязолинонов **2** по схеме.



Схема

Методами ТСХ и  $^1\text{H}$  ЯМР мониторинга исследовано влияние среды, ароматических заместителей с различными функциональными группами во 2- и 3-положении гетероцикла в соединении **2**, определено время реакции. По результатам мониторинга выявлены основные критерии и предложена схема

каскадного синтеза полициклических соединений, включающего реакцию конденсации, шестиэлектронной дисротаторной электроциклизации и сигматропного сдвига.

По предложенной схеме был произведён ряд квантово-химических расчётов для подтверждения механизма электроциклизации. Расчёты проводились в программном пакете Orca 4.0.1 методом Hartree-Fock с базисом 6-311\*G.

Расчёты подтвердили экспериментально установленные критерии протекания каскадной реакции, позволили количественно оценить образование связей и энергетический профиль реакции. Схема реакции отображена на рисунке.

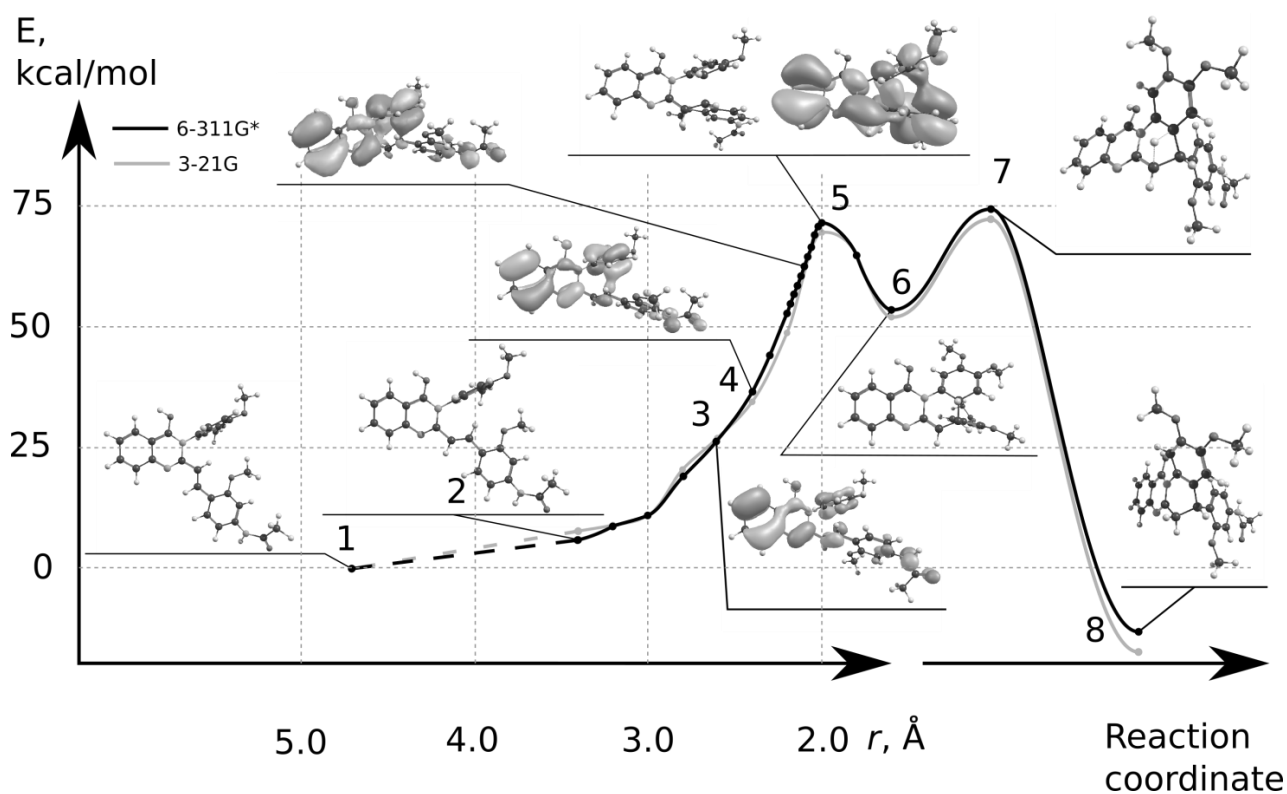


Рисунок. Энергетический профиль реакции электроциклизации, структуры и молекулярные орбитали в значимых для реакции точках

#### Список литературы

1. Ovchinnikova G., Kim G. A., Matochkina E. G. et al. Pericyclic reactions in the synthesis of new 5-aryl-5,6-dihydroquinolino[2,1-*b*]quinazolin-12-ones // *Mendeleev Commun.* 2019. Vol. 29, № 2. P. 135–137.

\* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-03-00112.